

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第3部門第2区分

【発行日】平成28年10月20日(2016.10.20)

【公表番号】特表2015-533826(P2015-533826A)

【公表日】平成27年11月26日(2015.11.26)

【年通号数】公開・登録公報2015-074

【出願番号】特願2015-535164(P2015-535164)

【国際特許分類】

C 07 D 519/00 (2006.01)

H 01 L 51/05 (2006.01)

H 01 L 51/30 (2006.01)

H 01 L 29/786 (2006.01)

H 01 L 51/46 (2006.01)

【F I】

C 07 D 519/00 C S P

H 01 L 29/28 1 0 0 A

H 01 L 29/28 2 5 0 H

H 01 L 29/28 2 5 0 G

H 01 L 29/78 6 1 8 B

H 01 L 31/04 1 5 4 B

H 01 L 31/04 1 5 4 C

H 01 L 31/04 1 5 4 D

【手続補正書】

【提出日】平成28年9月1日(2016.9.1)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

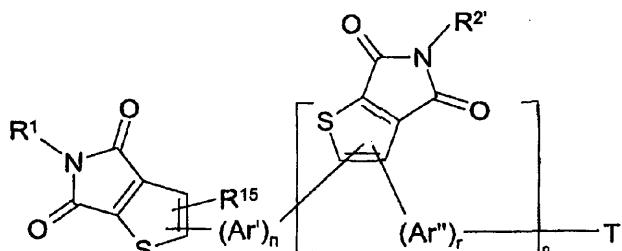
【補正の内容】

【特許請求の範囲】

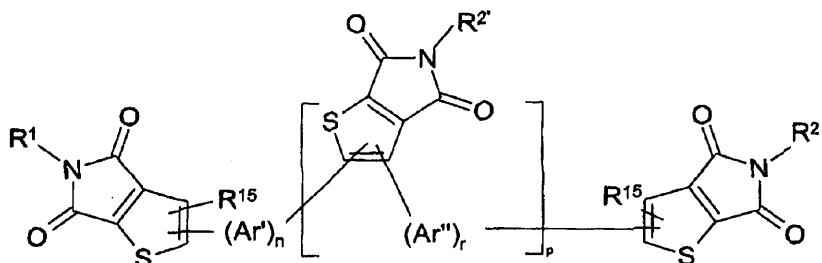
【請求項1】

下記式(III)及び(IV)からなる群から選択される式を有する化合物。

【化1】



式(III)



式(IV)

上記式中、R² 及 R¹、及 R² は互いに独立に、フェニル基及び置換フェニル基からなる群のなかで選択され；

Ar'、Ar'' は互いに独立に、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、及び二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基からなる群のなかで選択され；

R¹~⁵ は、水素、ハロゲン、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のアルキル基、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルコキシアルキル基、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のハロゲン化アルキル基、C₃~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、及びC₁~C₂₀ の直鎖状又は分岐状のニトリル基からなる群のなかで選択され；

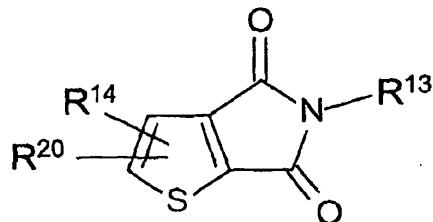
n、r は互いに独立に、1~50 の整数であり；

p は 0~5 の整数であり；

T はその化合物の末端単位であって、かつ、水素、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のアルキル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のハロアルキル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、C₃~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルコキシアルキル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシル基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシアミド基、C₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のアルキルスルホン酸基、及びC₁~C₄₀ の直鎖状又は分岐状のニトリル基、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、並びに二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基のなかから選択され；

但し、下記式 A の化合物を除く：

【化2】



式A

式中、R^{1~3}は、フェニル、4-クロロフェニル、3-トリフルオロメチルフェニルからなる群のなかから選択され；R^{1~4}は、フェニル、2-フルオロフェニル、3-フルオロフェニル、4-フルオロフェニル、2-クロロフェニル、3-クロロフェニル、4-クロロフェニル、2-メチルフェニル、3-メチルフェニル、4-メチルフェニル、2-トリフルオロメチルフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、4-トリフルオロメチルフェニル、2-メトキシフェニル、3-メトキシフェニル、4-メトキシフェニル、2,4-ジクロロフェニル、2,4,6-トリメチルフェニル、2-チエニル、3-チエニル、2-ピリジル、3-ピリジル、4-ピリジルからなる群のなかから選択され；R^{2~0}は、H、C_{1~4}、F、メチル、メトキシからなる群のなかから選択される。

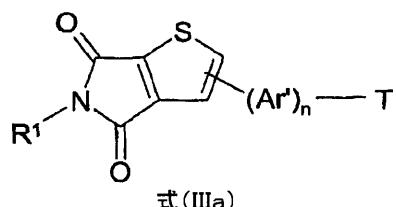
【請求項2】

pが0であり、nが2~50である、請求項1に記載の化合物。

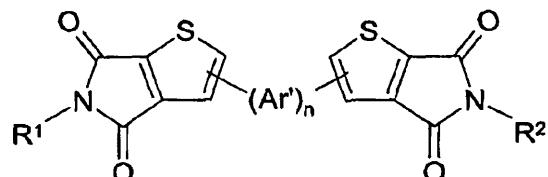
【請求項3】

下記式(IIIA)及び式(IVa)からなる群のなかで選択される式を有する、請求項1又は2に記載の化合物。

【化3】



式(IIIa)



式(IVa)

上記式中、R¹、R²は互いに独立に、フェニル基及び置換フェニル基からなる群のなかから選択され；

Ar'は、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、及び二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基からなる群のなかから選択され；

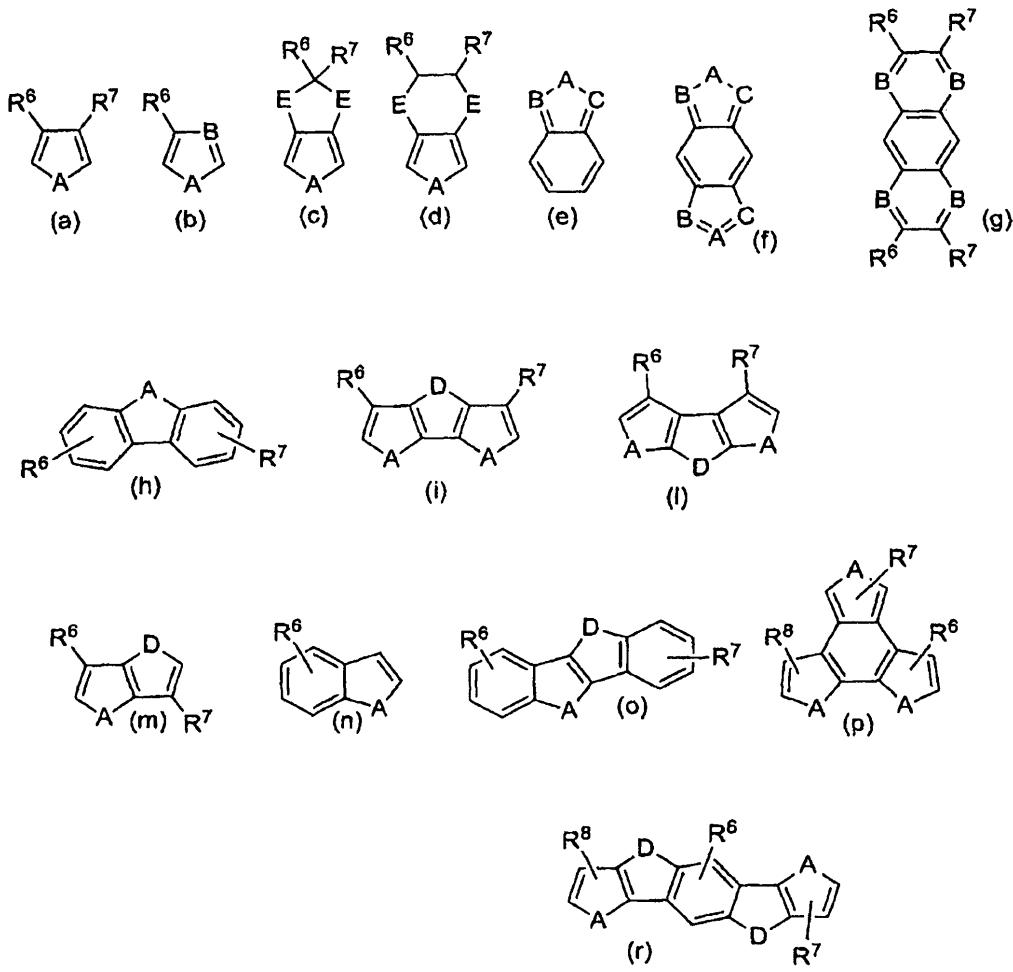
Tはその化合物の末端単位であって、かつ、水素、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のアルキル基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のハロアルキル基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、C_{3~4}の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のアルコキシリル基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシリル基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシアミド基、C_{1~4}の直鎖状又は分岐状のアルキルスルホン酸基、及びC_{1~4}の直鎖状又は分岐状のニトリル基、

単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、ベンジル基、及び置換されたベンジル基、並びに二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基のなかから選択される。

【請求項4】

請求項 1 ~ 3 のいずれか一項に記載の化合物であって、 A r が、以下の単位 (a) 、 (b) 、 (c) 、 (d) 、 (e) 、 (f) 、 (g) 、 (h) 、 (i) 、 (l) 、 (m) 、 (n) 、 (o) 、 (p) 、 及び (r) からなる群のなかから選択される単位である化合物。

【化 4】



上記式中、Aは、S、O、Se原子、及びSO、SO₂、R¹₇-P=O、P-(R¹₇)₂、N-R¹₆、Si(R¹₆)₂基からなる群のなかから選択され；
⁷Dは、S、O、Se原子、及びSO、SO₂、R¹₇-P=O、P-(R¹₇)₂、N-R¹₆、Si(R¹₆)₂基からなる群のなかから選択され；
B、Cは互いに独立に、N原子、及びNR¹₆基からなる群のなかから選択され；
Eは、C(R¹₆)₂、S、O、及びNR¹₆基からなる群のなかから選択され；
R⁶、R⁷、及びR⁸は互いに独立に、水素、ハロゲン、C₁~C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル基、C₂~C₂₀の直鎖状又は分岐状アルケニル基、C₃~C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル-アルケニル基、C₁~C₂₀の直鎖状又は分岐状ハロゲン化アルキル基、C₂~C₂₀の直鎖状又は分岐状のアルキニル基、C₃~C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル-アルキニル基、C₃~C₂₀の直鎖状又は分岐状シクロアルキル基、C₁~

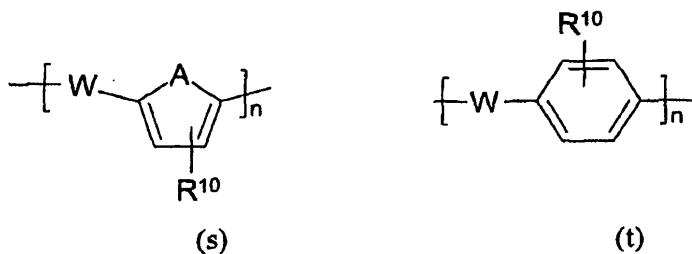
C_{20} の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルコキシル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ヘテロアルコキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシアミド基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルスルホン酸基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ニトリル基、 $C_5 \sim C_{40}$ アリール基、 $C_6 \sim C_{40}$ アルキルアリール基からなる群から選択され；

R^{1-6} 、 R^{1-7} は互いに独立に、水素、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルケニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル-アルケニル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ハロゲン化アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のアルキニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル-アルキニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルコキシル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ヘテロアルコキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシアミド基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルスルホン酸基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ニトリル基、 $C_5 \sim C_{40}$ アリール基、 $C_6 \sim C_{40}$ アルキルアリール基からなる群から選択される。

【請求項5】

(A r)_n 単位が、下記の基 (s) 及び (t) からなる群のなかから選択される、請求項 1 ~ 4 のいずれか一項に記載の化合物。

【化 5 】



式中、A は請求項 4 で定義した通りであり；

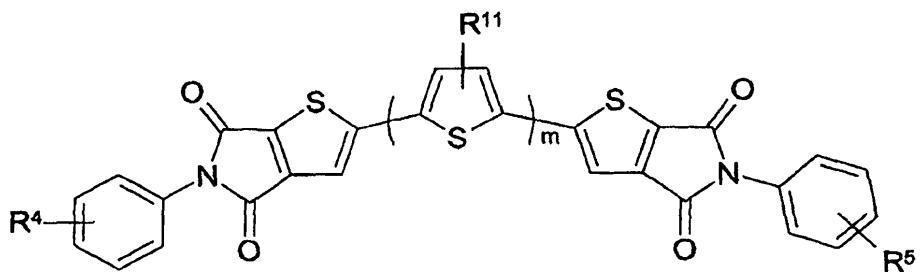
Wは、請求項4に記載した単位(a)、(b)、(c)、(d)、(e)、(f)、(g)、(h)、(i)、(l)、(m)、(n)、(o)、(p)、及び(r)からなる群のなかから選択される基であり；

$R^{1 \sim 0}$ は、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルケニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル-アルケニル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ハロゲン化アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のアルキニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル-アルキニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状シクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルコキシリル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ヘテロアルコキシリル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシリル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシアミド基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキルスルホン酸基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ニトリル基、 $C_5 \sim C_{40}$ アリール基、 $C_6 \sim C_{40}$ アルキルアリール基からなる群から選択される。

【請求項 6】

下記式（V）を有する請求項1に記載の化合物。

【化 6】



式(V)

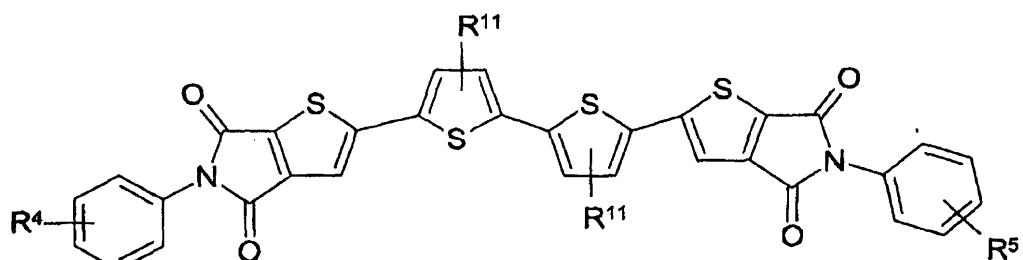
式中、R⁴、R⁵、R¹¹は互いに独立に、水素、ハロゲン、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル基、C₂～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルケニル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル-アルケニル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状ハロゲン化アルキル基、C₂～C₂₀の直鎖状又は分岐状のアルキニル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル-アルキニル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状シクロアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルコキシル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状ヘテロアルコキシアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシアミド基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルスルホン酸基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状ニトリル基、C₅～C₄₀アリール基、C₆～C₄₀アルキルアリール基からなる群のなかから選択され；

m は 1 ~ 50 の 整 数 で あ る。

【請求項 7】

下記式 (V I) を有する、請求項 6 に記載の化合物。

【化 7】

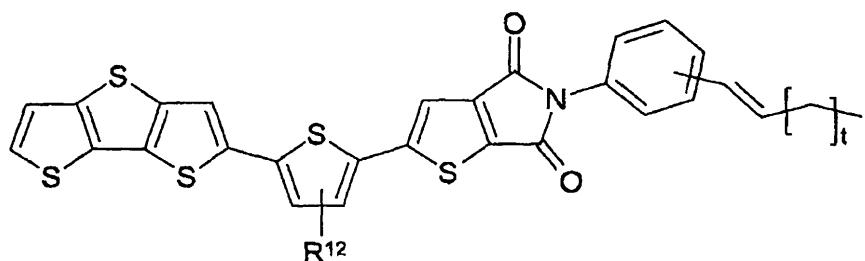


式(VI)

【請求項 8】

下記式 (VII) を有する、請求項 1 に記載の化合物。

【化 8】



式(VII)

式中、 R^{1-2} は、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルケニル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状アルキル-アルケニル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状ハロゲン化アルキル基、 $C_2 \sim C_{20}$ の

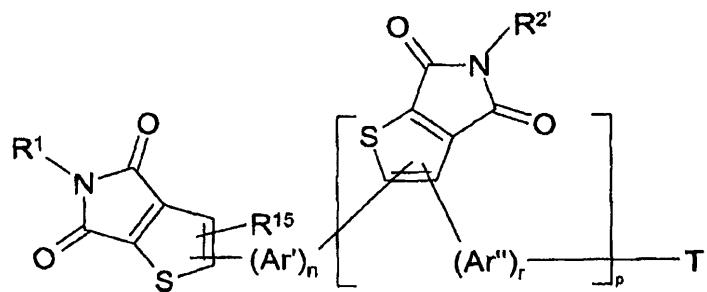
直鎖状又は分岐状のアルキニル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキル-アルキニル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状シクロアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルコキシル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルカルボキシアミド基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状アルキルスルホン酸基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状ニトリル基、C₅～C₄₀アリール基、C₆～C₄₀アルキルアリール基からなる群のなかから選択され；

tは2～6の整数である。

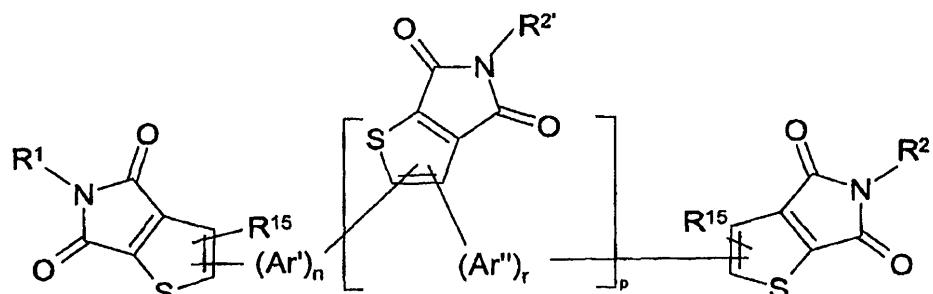
【請求項9】

下記式(III)及び(IV)からなる群から選択される式を有する化合物の、電子デバイス中の有機半導体材料としての使用。

【化9】



式(III)



式(IV)

上記式中、R²、R¹、及びR²は互いに独立に、フェニル基及び置換フェニル基からなる群のなかから選択され；

Ar'、Ar''は互いに独立に、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、及び二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基からなる群のなかから選択され；

R¹⁵は、水素、ハロゲン、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のヘテロアルコキシアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のハロゲン化アルキル基、C₃～C₂₀の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、及びC₁～C₂₀の直鎖状又は分岐状のニトリル基からなる群のなかから選択され；

n、rは互いに独立に、1～50の整数であり；

pは0～5の整数であり；

Tはその化合物の末端単位であって、かつ、水素、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のアルキル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のハロアルキル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、C₃～C₄の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシル基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシアミド基、C₁～C₄の直鎖状又は分岐状のアルキルスルホン酸基、及びC₁～C₄の直鎖状又は分岐状のニトリル基、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、ベンジル基、及び置換されたベンジル基、並びに二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基のなかから選択される。

【請求項 10】

請求項2～8のいずれか一項に記載の化合物の、電子デバイス中の有機半導体材料としての使用。

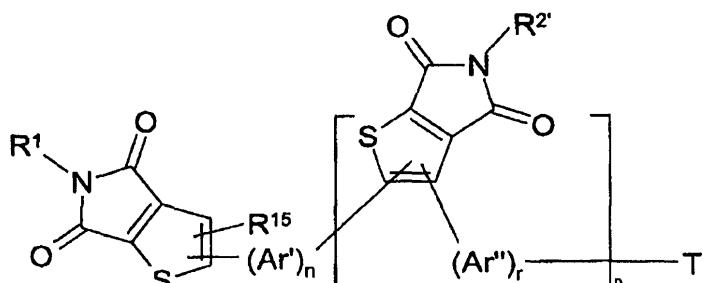
【請求項 11】

電子デバイス中のn型有機半導体としての、請求項9又は10に記載の使用。

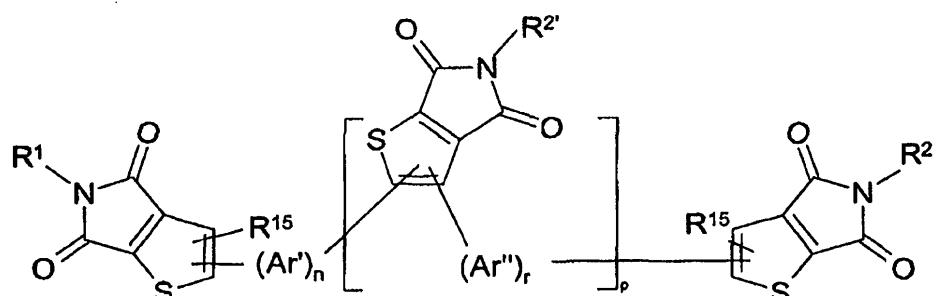
【請求項 12】

いくつかの電極と接触している半導体層を含み、前記半導体層が下記式(I II)及び(I V)からなる群のなかから選択される式を有する少なくとも1つの化合物を含む電子デバイス。

【化10】



式(III)



式(IV)

上記式中、R² 及 R¹、及及 R²は互いに独立に、フェニル基及び置換フェニル基からなる群のなかから選択され；

A_r、A_rは互いに独立に、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、及び二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基からなる群のなかから選

択され；

R^{1-5} は、水素、ハロゲン、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルコキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のハロゲン化アルキル基、 $C_3 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、及び $C_1 \sim C_{20}$ の直鎖状又は分岐状のニトリル基からなる群のなかから選択され；

n 、 r は互いに独立に、1～50 の整数であり；

p は0～5 の整数であり；

T はその化合物の末端単位であって、かつ、水素、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のアルキル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のハロアルキル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のヘテロアルキル基、 $C_3 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のシクロアルキル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のヒドロキシアルキル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のアルコキシル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシル基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のアルキルカルボキシアミド基、 $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のアルキルスルホン酸基、及び $C_1 \sim C_{40}$ の直鎖状又は分岐状のニトリル基、単環式アリール基、置換された単環式アリール基、多環式アリール基、置換された多環式アリール基、単環式ヘテロアリール基、置換された単環式ヘテロアリール基、多環式ヘテロアリール基、置換された多環式ヘテロアリール基、ベンジル基、及び置換されたベンジル基、並びに二量体、三量体、及び四量体としてそれらを組み合わせた基のなかから選択される。

【請求項 13】

いくつかの電極と接触している半導体層を含み、前記半導体層が請求項2～8のいずれか一項に記載の少なくとも1つの化合物を含む電子デバイス。